



MULTICOLINEALIDAD Y FALTA DE AJUSTE EN SUPERFICIES DE RESPUESTA ESTIMADAS EN INVESTIGACIONES PUBLICADAS DE SCIENTIA AGROPECUARIA

MULTICOLLINEARITY AND LACK OF FIT IN ESTIMATED RESPONSE SURFACES IN SCIENTIA AGROPECUARIA PUBLISHED RESEARCHES

Minchón-Medina, Carlos¹

cminchonm@gmail.com

¹ Facultad de Ciencias Físicas y Matemáticas, Departamento de Estadística, Universidad Nacional de Trujillo, Av. Juan Pablo II s/n. Ciudad Universitaria, Trujillo, Perú.

RESUMEN

En la industria alimentaria para la obtención o mejora de productos se conducen experimentos para optimizar las respuestas empleando la metodología de superficie de respuesta (MSR) a los resultados de experimentos con diseños rotatables de segundo orden. Tales diseños consideran modelos de regresión polinomiales los cuales pueden presentar *multicolinealidad* y las réplicas en los puntos centrales permiten evaluar la *no falta de ajuste* del modelo. Una revisión de los tres únicos artículos publicados en la Revista Ciencia Agropecuaria en el periodo 2014-2015, que corresponden a este tipo de diseño experimental, se ha encontrado ciertos rasgos de multicolinealidad, y no hay evidencias de haberse evaluado la "no falta de ajuste" de los modelos polinomiales estimados. Tal vez sea la razón por la que en varios de los casos presentados en los artículos no se ha encontrado efecto estadísticamente significativo de las variables en los modelos. Por ello, el propósito del presente trabajo fue evaluar la presencia de multicolinealidad y falta de ajuste de las superficies de respuesta estimadas en investigaciones publicadas por la revista. El análisis se realizó con el mismo software Statistica utilizado en los estudios, aunque en una versión actualizada. Las evaluaciones confirmaron la presencia de multicolinealidad y falta de ajuste en los modelos estimados. La finalidad del trabajo fue contribuir al mejoramiento de la calidad de los artículos publicados en esta revista, por lo que se recomienda la incorporación de al menos un estadístico en el panel de revisores.

Palabras clave: Superficie de respuesta, optimización, multicolinealidad, falta de ajuste.

ABSTRACT

In the food industry for the production or improvement of products are conducted experiments to optimize the responses using response surface methodology (MSR) to the results of experiments with rotatable designs of second order. Such designs consider polynomial regression models which can present multicollinearity and the replicas at the central points allow to evaluate the non-lack of fit in the models. A review of the only three articles published by Agricultural Science in the period 2014-2015, which correspond to this type of experimental design, has found certain features multicollinearity, and there is no evidence of having evaluated the non lack of fit of the estimated polynomial models. It is perhaps the reason why in several of the cases presented in the articles there has been no statistically significant effect of the variables in the models. It is perhaps the reason why in several of the cases presented in the articles there has been effect no statistically significant of the variables in the models. Therefore, the purpose of the present study was to evaluate the presence of multicollinearity and lack of fit of the response surfaces estimated in research published by the journal. The analysis was performed with Statistica software, used in the studies, although in an updated version. The evaluations confirmed the presence of multicollinearity and lack of fit in the estimated models. The purpose of the paper was to contribute to the improvement of the quality of the articles published in this journal, so it is recommended the incorporation of at least one statistician in the panel of reviewers.

Keywords: Response surface, optimization, multicollinearity, lack of fit.

INTRODUCCIÓN

La metodología de superficie de respuesta (MSR) es un conjunto de técnicas estadísticas y matemáticas útiles para desarrollar, mejorar y optimizar los procesos, también para el diseño, desarrollo y formulación de nuevos productos, así como en la mejora de los diseños de productos existentes (Myers *et al.*, 2016).

En la industria de alimentos, la MSR ha sido aplicada para analizar experimentos en la obtención o mejora de productos alimenticios, como deshidratación osmótica de sardina (Reyes *et al.*, 2005), en piña (Zapata *et al.*, 2011) y en láminas de mango (Zapata y Montoya, 2012). En la industria química esta metodología ha sido aplicada en la fermentación del tepache por Corona *et al.* (2013) y en contaminación ambiental para la degradación fotocatalítica del colorante naranja de metilo (Del Ángel *et al.*, 2015), entre otros.

En la presente investigación se analizan tres casos de empleo de la metodología de respuesta, los cuales fueron publicados en la Revista Scientia Agropecuaria: (1) secado de lúcumas (Gamboa *et al.*, 2014), (2) fuerza del gel y rendimiento de gelatina a partir de la piel de tollo (Miano *et al.*, 2014), y (3) producción de biomasa de *Spirulina* sp. (Vásquez *et al.*, 2014).

La literatura especializada proporciona una serie de diseños experimentales empleados para estimar la superficie de respuesta, siendo la situación más común aquella en la que el experimentador debe aproximar la función de respuesta, la cual es desconocida, con un apropiado modelo empírico (Myers *et al.*, 2016). La regresión múltiple proporciona un conjunto de técnicas útiles para construir los tipos de modelos empíricos requeridos en MSR, dependiendo del grado del polinomio considerado como aproximación de la desconocida superficie de respuesta.

En los casos referenciados, se emplearon diseños factoriales (Zapata *et al.*, 2011; Zapata y Montoya, 2012), diseño de Box-Behnken (Del Ángel *et al.*, 2015), diseños centrales (Corona *et al.*, 2013), diseños compuestos rotatables de segundo orden (Gamboa *et al.*, 2014; Miano *et al.*, 2014; Vásquez *et al.*, 2014), y diseño compuesto central con bloques incompletos (Reyes *et al.*, 2005). Las superficies de respuesta propuestas corresponden a modelos de segundo orden; los efectos lineales, cuadráticos e interactivos de los factores son evaluados empleando el test T y análisis de varianza (ANVA); y la contribución de los factores en la explicación de la respuesta a través del coeficiente de determinación.

Como se ha indicado, la MSR requiere de la regresión múltiple para la estimación de la superficie de respuesta, siendo uno de sus supuestos básicos la no multicolinealidad entre las variables independientes. La **multicolinealidad** es perfecta si una de las variables independientes es función de otras, y como consecuencia lleva a aumentar los errores estándar de los coeficientes de regresión, haciendo más difícil encontrar efectos estadísticamente significativos. Hay riesgo de multicolinealidad en situaciones muy específicas, como cuando se introducen efectos de interacción o términos polinomiales de orden superior en el modelo (Best and Woolf, 2015). Justamente, este es uno de los problemas que ameritan la inclusión de casos seleccionados de la Revista Scientia Agropecuaria en la presente investigación, debido a que teniendo un R^2 considerable no se ha tenido mayores efectos de los factores.

La evaluación de los coeficientes de regresión se recomienda cuando el modelo estimado no muestra *falta de ajuste* o “lack of fit” (en inglés). No se puede evaluar la significancia estadística de los coeficientes de regresión en un modelo que no le corresponde. La prueba formal de **no falta de ajuste** es posible realizarla cuando el diseño experimental considerado o más observaciones repetidas (Myers *et al.*, 2016), generalmente en los puntos centrales del diseño. En los estudios referidos, los únicos que presentaron esta prueba fueron los de Zapata *et al.* (2011) y Zapata y Montoya (2012).

El propósito del presente trabajo es evaluar la presencia de multicolinealidad y falta de ajuste en tres investigaciones experimentales publicadas en la Revista Scientia Agropecuaria, que emplearon un diseño central compuesto rotatable de segundo orden.

MATERIALES Y MÉTODOS

El estudio descriptivo consistió en una revisión de artículos publicados en la Revista Scientia Agropecuaria. La población objetivo estuvo conformada por los artículos publicados entre 2014 y 2015, la población muestral estuvo conformada por únicamente cuatro artículos, incluidos como parte de las referencias (Gamboa *et al.*, 2014; Miano *et al.*, 2014; Vásquez *et al.*, 2014). Los artículos se fueron obtenidos directamente de la página web de la revista. El análisis de los diseños empleados en cada artículo consistirá en tres fases empleando Statistica 12:

- Evaluación del diseño del experimento. Se simuló un diseño central rotatable de segundo orden del mismo tamaño del experimento a analizar: puntos factoriales, puntos centrales y puntos axiales, comparándose los valores originales de los factores con los valores recodificados de los mismos a partir de la simulación.
- Evaluación de la multicolinealidad de los factores
Si las variables son empleadas con sus variables originales. Se tomará como indicadores: R^2 alto, pero pocas pruebas t significativas, y principalmente los factores influyentes de la varianza (VIF's).
- Evaluación de la no falta de ajuste del modelo.
Los experimentos en evaluación tienen réplicas en el punto central, esto es suficiente para dividir la suma de cuadrados del error residual en falta de ajuste y error puro, valores necesarios para realizar la prueba de “*no falta de ajuste*”. La prueba de falta de ajuste se hizo empleando Statistica 12. Además, se consideró una comparación gráfica entre las superficies de respuesta y gráficos de contornos elaborados en Statistica 12 con gráficos interpolados, por el método de la distancia, construidos con Minitab 17.

En el aspecto ético, una vez terminado el informe será remitido a la Revista Scientia Agropecuaria para conocimiento y demás fines.

RESULTADOS

El estudio comprende la evaluación de tres casos de diseños centrales compuestos rotatables de segundo orden, con un total de doce corridas experimentales incluyendo cuatro puntos centrales en el primero, y once corridas experimentales con tres puntos centrales en el segundo y tercer caso. Los puntos axiales fueron determinados para cumplir la rotabilidad únicamente, por ello su valor es: $\alpha = 1.41421$.

En la tabla 1, se muestra la relación de los valores experimentales reales y los valores que le corresponderían como parte del diseño central rotatable de segundo orden.

Se observa que, en el caso de Gamboa *et al.*, los puntos axiales experimentados se corresponden con los del diseño; en el estudio de Miano *et al.*, hay una diferencia de ± 0.36 en X_1 y ± 0.04 en X_2 ; y en el estudio de Vásquez *et al.*, fueron de -0.01 y -0.09 en X_1 , y de ± 0.02 en X_2 . En este último estudio hay que agregar, que también se cometió un error al considerar como punto central de X_1 al valor de 0.70 en lugar de 0.75 .

En la tabla 2 se presentan los análisis de regresión de los *dos primeros estudios, los que incluyen los valores experimentales originales de los factores, y todos los componentes del modelo cuadrático*, para verificar que los estudios evaluados emplearon la forma tradicional de hacer el análisis de regresión lineal múltiple, aplicada a modelos polinomiales de segundo orden.

Tabla 1

Valores experimentales de los factores en los diseños centrales compuestos rotatables desegundo orden

	Tipo	Denominación	Valor codificado	Experimental		Diseño	
				X1	X2	X1	X2
Gamboa <i>et al.</i>		Mínimo	-1	15.86	1.29	15.86	1.29
		Máximo	1	44.14	2.71	44.14	2.71
	Central		0	30.00	2.00	30.00	2.00
	Axial	$-\alpha$	-1.41421	10.00	1.00	10.00	1.00
		α	1.41421	50.00	3.00	50.00	3.00
Miano <i>et al.</i>	Factorial	Mínimo	-1	60.50	65.10	60.50	65.10
		Máximo	1	209.50	89.90	209.50	89.90
	Central		0	135.00	77.50	135.00	77.50
	Axial	$-\alpha$	-1.41421	30.00	60.00	29.64	59.96
		α	1.41421	240.00	95.00	240.36	95.04
Vásquez <i>et al.</i>	Factorial	Mínimo	-1	0.30	1.60	0.30	1.60
		Máximo	1	1.20	4.40	1.20	4.40
	Central		0	0.70	3.00	0.75	3.00
	Axial	$-\alpha$	-1.41421	0.10	1.00	0.11	1.02
		α	1.41421	1.30	5.00	1.39	4.98

En el estudio de Gamboa *et al.*, sólo se incluye la variable respuesta humedad, y no la variable respuesta color debido a que sólo presenta los valores observados de sus componentes. Los autores para la variable humedad presentan el siguiente modelo:

$$\%H = 27.35 - 0.901X_1 + 0.016X_1^2 + 3.77X_2^2 - 0.22X_1X_2$$

Hay una similitud en el intercepto, lo cual hace suponer que emplearon los factores en unidades originales en el análisis de regresión. Por otro lado, según nuestros resultados, el componente no significativo fue x_1^2 con coeficiente -5.1224 ($p=0.4218>0.05$) y no X_2 con coeficiente 3.7591 ($p=0.0300<0.05$), y sabiendo que al eliminar el componente significativo los coeficientes se vuelven a estimar, diremos que sólo hubo un error de digitación en el modelo presentado en el artículo original. La correspondencia de otros indicadores del análisis de varianza (ANVA) o la similitud del coeficiente de determinación R^2 , eliminándose el componente no significativo, no ameritó mayor evaluación.

El análisis de regresión comprende la evaluación de varios supuestos, solamente incluimos el análisis de multicolinealidad. En este caso, se tuvo que recurrir al programa Minitab 17 para calcular los factores inflatores de la varianza (FIV), cada uno de los cuales es mayor que 10, llegando incluso a ser aproximadamente cinco veces este valor. No fue analizado este problema en el artículo original.

Tabla 2

Análisis de regresión y de la multicolinealidad en los estudios de Gamboa et al. y Miano et al. en el modelo completo con todos los factores.

Variable respuesta	Factor	Modelo completo				
		Efecto	Error estándar	T	p	FIV ¹
Gamboa et al.	Humedad: R ² =95.53, p=0.0006	Mean/Interc.	27.3544	8.0738	3.3880	0.0147
	(1) X1 (L)	-0.9015	0.2643	-3.4113	0.0143	39.35
	X1 (Q)	0.0162	0.0033	4.8765	0.0028	23.52
	(2) X2 (L)	-5.1224	5.9426	-0.8620	0.4218	49.97
	X2 (Q)	3.7591	1.3293	2.8279	0.0300	41.04
	1L by 2L	-0.2239	0.0839	-2.6679	0.0371	25.84
Miano et al.	Rendimiento: R ² =91.34, p=0.0109	Mean/Interc.	10.0612	24.9365	0.4035	0.7033
	(1) X1 (L)	0.0797	0.0665	1.1994	0.2841	97.58
	X1 (Q)	-0.00007	0.0001	-0.6714	0.5318	19.82
	(2) X2 (L)	0.0808	0.6121	0.1320	0.9002	229.60
	X2 (Q)	0.00001	0.0039	0.0015	0.9988	223.14
	1L by 2L	-0.00016	0.0008	-0.2120	0.8405	85.41
	Fuerza delGel: R ² =93.34, p=0.0058	Mean/Interc.	823.5195	249.5291	3.3003	0.0215
	(1) X1 (L)	0.8755	0.6650	1.3165	0.2451	
	X1 (Q)	-0.0007	0.0011	-0.6298	0.5565	
	(2) X2 (L)	-18.0733	6.1248	-2.9508	0.0319	
	X2 (Q)	0.1117	0.0389	2.8737	0.0348	
	1L by 2L	-0.0127	0.0077	-1.6594	0.1579	

¹ Factores inflatores de la varianza (FIV), calculado con MINITAB 17

El estudio de Miano *et al.* comprende dos variables respuestas. El modelo que los autores estimaron para el rendimiento, expresado en unidades originales, es como sigue:

$$Y_1 = 10.06 + 0.079X_1 - 0.00007X_1^2 + 0.081X_2^2 + 0.0001X^2 - 0.0001X_1X_2$$

Al comparar los coeficientes estimados de este modelo con los correspondientes presentados en la tabla2, muestra por un lado que en la estimación se empleó los valores originales de las variables independientes, y por otro que hubo error de digitación en el coeficiente 0.00001 de X_2^2 . Los errores de redondeo también estuvieron presentes.

El alto valor del coeficiente de determinación $R^2=91.34\%$ y $p=0.0109$ en el ANVA, pero ninguno de los coeficientes de regresión significativos ($p>0.05$, en todos los casos), es una evidencia de multicolinealidad. La presencia de este problema en el análisis de regresión es ratificada a través de los VIF's, los cuales fueron más allá que veinte veces el valor crítico de 10. No fue analizado este problema en el artículo original.

En lo que corresponde al análisis de regresión de la fuerza del gel, el modelo estimado fue:

$$Y_2 = 823.5 + 0.8755X_1 - 0.0007X_1^2 - 18.073X_2 + 0.112X_2^2 - 0.0127X_1X_2$$

Damos la conformidad del modelo estimado en relación al uso de los valores originales de los factores, incluyendo los resultados del ANVA ($p=0.0058<0,05$) y coeficiente de determinación ($R^2=93.34\%$). Sin embargo, el modelo estimado pudo haber sido reducido a un modelo más pequeño eliminando los tres factores no significativos o los componentes del modelo que producían la multicolinealidad. Como se sabe, al igual que en la respuesta anterior, los VIF's fueron más allá que veinte veces el valor crítico de 10. Tampoco fue analizado este problema en el artículo original.

Por razones de espacio, el estudio de Vásquez *et al.* se presenta en la tabla 3, el cual comprende cuatro respuestas: biomasa (ϕ), fase de adaptación (λ), velocidad específica (μ) y tiempo de generación (G).

El modelo estimado por los autores para la biomasa, con las variables en unidades originales, es:

$$\phi = 0.810535 - 0.601226X_1 + 0.791674X_1^2 - 0.181394X_2 + 0.040649X_2^2 - 0.072543X_2$$

Damos la conformidad del modelo estimado en relación al uso de los valores originales de los factores, incluyendo coeficiente de determinación ($R^2=98.94\%$), pero cierta objeción en el ANVA ($p=0.0001<0,05$ en lugar de $p=0.0028<0.05$).

En cuanto a la multicolinealidad, los VIF's fueron más del triple del valor crítico de 10. No fue analizado este problema en el artículo original, y como la multicolinealidad es un problema entre las variables independientes, también está presente en el análisis de las otras variables respuestas λ , μ y G.

Los autores, respecto a las restantes variables respuestas, únicamente precisan que presentan coeficientes de determinación inferiores al 88% a pesar de su significancia estadística menor a 0.05. En lo que concierne al coeficiente de determinación confirmamos el resultado, los valores para las respuestas λ , μ y G en nuestro fueron de 88.49, 64.62 y 74.34%, respectivamente. El problema surge con los resultados del ANVA, es significativo en la respuesta λ ($p=0.0215<0.05$) pero no en las respuestas μ ($p=0.2623>0.05$) y G ($p=0.1340>0.05$), por lo que no se confirma que todos presentan una significancia estadística menor a 0.05, el valor de $p=0.0121$ que los autores presentan para las dos últimas variables es erróneo. Y, al no presentarse coeficientes de regresión significativos, es de suponer la presencia ya confirmada de la multicolinealidad.

Los resultados del análisis de las superficies de respuesta que se muestran más adelante corresponden al realizado con los valores codificados de los factores, como resultado de diseños centrales compuestos rotatables de segundo orden correctamente diseñados.

Tabla 3.

Análisis de regresión y de la multicolinealidad en el estudio de Vásquez et al. en el modelo completo con todos los factores.

Variable respuesta	Factor	Modelo completo			
		Efecto	Error estándar	t	P
ϕ : $R^2=98.94$, $p=0.0001$	Mean/Interc.	0.8110	0.0745	10.8907	0.0001
	(1) X1 (L)	-0.6021	0.1085	-5.5487	0.0026
	X1 (Q)	0.7922	0.0590	13.4373	0.0000
	(2) X2 (L)	-0.1817	0.0369	-4.9239	0.0044
	X2 (Q)	0.0407	0.0055	7.3964	0.0007
	1L by 2L	-0.0726	0.0208	-3.4915	0.0174
λ : $R^2=88.49$, $p=0.0215$ Vásquez <i>et al.</i>	Mean/Interc.	40.2379	16.8984	2.3812	0.0631
	(1) X1 (L)	13.5859	24.6233	0.5517	0.6049
	X1 (Q)	-34.0792	13.3777	-2.5475	0.0514
	(2) X2 (L)	-0.7425	8.3726	-0.0887	0.9328
	X2 (Q)	-0.8188	1.2491	-0.6555	0.5411
	1L by 2L	3.7005	4.7163	0.7846	0.4682
μ : $R^2=64.62$, $p=0.2623$	Mean/Interc.	0.0356	0.0177	2.0147	0.1000
	(1) X1 (L)	0.0101	0.0257	0.3909	0.7119
	X1 (Q)	-0.0092	0.0140	-0.6611	0.5378
	(2) X2 (L)	-0.0074	0.0088	-0.8432	0.4376
	X2 (Q)	0.0002	0.0013	0.1220	0.9076
	1L by 2L	0.0038	0.0049	0.7695	0.4764
G: $R^2=74.34$, $p=0.1340$	Mean/Interc.	31.0882	25.2756	1.2300	0.2734
	(1) X1 (L)	-55.0011	36.8300	-1.4934	0.1956
	X1 (Q)	36.9344	20.0095	1.8458	0.1242
	(2) X2 (L)	10.5902	12.5232	0.8457	0.4363
	X2 (Q)	-0.3782	1.8684	-0.2024	0.8476
	1L by 2L	-5.7216	7.0543	-0.8111	0.4542

¹ Factores inflatores de la varianza (FIV), calculado con MINITAB 17

En la tabla 4, se hace un resumen del modelo con todos los componentes, indicándose el número de coeficientes que resultaron significativos, el coeficiente de determinación con ese modelo, el tipo de solución óptima de la respuesta (máximo, mínimo o punto de silla), los valores críticos codificados que llevarían a esa solución, el coeficiente de determinación que presenta el modelo sin coeficientes de regresión no significativos y la prueba de falta de ajuste para verificar la adecuación del modelo.

En nuestra evaluación no se presenta en tablas los resultados del análisis de la multicolinealidad, pero usando MINITAB 17 es posible verificar que los VIF's son iguales a 1 para el efecto lineal e interactivo de los dos factores en los tres estudios evaluados, y 1.04 para los efectos cuadráticos en el estudio de Gamboa *et al.* y 1.09 en los estudios de Miano *et al.* y Vásquez *et al.*

Los coeficientes de determinación con el modelo completo y con factores codificados son muy similares a los obtenidos mediante el análisis de regresión con los factores con valores originales, pero en algunos casos se ha logrado alcanzar la significancia estadística de más coeficientes de regresión (humedad, rendimiento y λ), y en otros lo contrario (λ). Asimismo, se llegó a determinar el tipo de superficie de respuesta estimada, como un mínimo en la humedad y en ϕ , o un máximo en λ , y no alcanzándose una respuesta óptima (punto de silla) en el resto de variables respuestas.

Empleando Statistica 12 fue posible estimar los puntos críticos codificados de los factores que producen la respuesta óptima o el punto de silla, siendo posible obtener humedad mínima de 95.93% en el experimento de Gamboa *et al.*, o mínimo de 0.411 en ϕ , y máximo de 41.678 en λ en el experimento de Vásquez *et al.*

Sin embargo, un aspecto sumamente importante en este proceso de estimación es que, en todos los casos, se estaba haciendo estimaciones para la variable respuesta con un modelo inadecuado, debido a que en todos ellos la falta de ajuste alcanzó la significancia estadística ($p < 0.05$). Por esta razón no se presentan resultados con las ecuaciones de los modelos estimados debido a esta falta de ajuste.

Con el propósito de ahondar sobre el tema de falta de ajuste, se presenta en la figura 1 las superficies de respuestas y gráficos de contornos modelados en Statistica y graficados en Minitab de la humedad en el estudio de Gamboa *et al.*, como modelo completo comprende los efectos lineales cuadráticos e interactivos codificados de los factores para la estimación de los coeficientes de regresión.

El software Statistica determinó de acuerdo a la data de la humedad que el caso correspondía a un mínimo, y obtuvo la humedad mínima de 4.082%, la cual se obtiene con un tiempo codificado de 0.767 (40.85 min) y un espesor codificado de -0.143 (1.90 mm); en este programa los valores más bajos de la respuesta están en la zona verde y los más altos en la zona roja. Por el contrario, por efecto, Minitab muestra de color verde los valores más altos y en azul los valores más bajos.

Tabla 4.

Análisis de la superficie de respuesta en los diseños centrales compuestos rotatables de segundo orden.

	Variables respuesta	R ² , completo	Coeficientes significativos	R ² , reducido	p, falta de ajuste	Óptimo	Valores críticos codificados		
							Y	X1	X2
Gamboa <i>et al.</i>	Humedad	95.53	5	95.53	0.0039	Mínimo	4.082	0.767	-0.143
Miano <i>etal.</i>	Rendimiento	91.43	1	86.71	0.0050	Punto desilla	31.833	4.934	-2.712
	Fuerza delGel	93.34	3	89.14	0.0121	Punto desilla	97.962	-2.806	-0.065
Vásquez <i>et al.</i>	ϕ	95.30	3	92.39	0.0284	Mínimo	0.411	-0.517	-0.209
	λ	87.10	1	61.37	0.0064	Máximo	41.678	-1.253	-1.872
	μ	64.87	0		0.0241	Punto desilla	0.272	1.763	0.336
	G	72.00	0		0.0082	Punto desilla	26.486	0.99	0.967

Al comparar la superficie de respuesta modelada en Statistica contrasta de la graficada con la superficie interpolada graficada por Minitab. El gráfico de contornos es la proyección de plano en el plano bidimensional, observándose también diferencias entre el gráfico estimado a partir del gráfico interpolado. La falta de ajuste se debe a estas diferencias, la superficie de respuesta no se ajusta a la superficie interpolada que muestra el efecto de los factores sobre la humedad ($p=0.0039<0.05$).

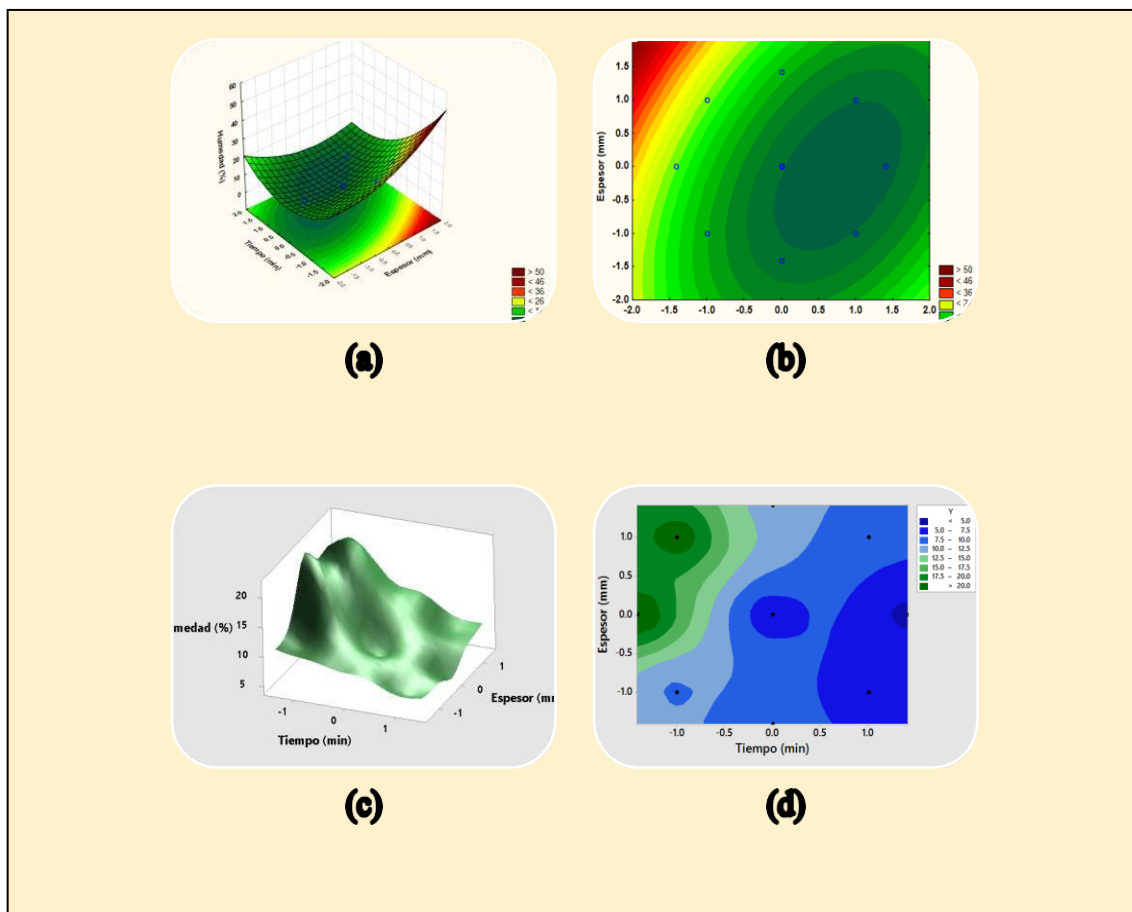


Figura 1. Superficies de respuestas y gráficos de contornos modelados en Statistica (a y b) y graficados en Minitab de la humedad (c y d), con factores codificados, en el estudio de Gamboa *et al.*

En forma similar, la figura 2 muestra las superficies de respuestas y gráficos de contornos modelados en Statistica y graficados en Minitab de la biomasa (ϕ), con factores codificados, en el estudio de Vásquez *et al.*, como modelo completo. El gráfico de contornos en Statistica puede ser confrontado con el presentado en el trabajo original.

Statistica asumió de acuerdo a la data que el caso correspondía a un mínimo para la biomasa, y obtuvo la solución óptima para la de biomasa de 0.411, la cual se obtiene con una salinidad codificada de -0.517 (0.52%) y un bicarbonato codificado de -0.209 (2.71 g/L). Nuevamente se observa la diferencia entre las superficies estimadas con Statistica y las superficies interpoladas en Minitab, lo que fue evidenciado en la prueba de falta de ajuste ($p=0.0284<0.05$).

Finalmente, somos conscientes de la necesidad de evaluar los supuestos básicos de los modelos de regresión, los cuales son aplicables a la estimación de superficies de respuesta en diseños centrales de segundo orden. Pero, los objetivos del presente trabajo incluían la multicolinealidad y falta de ajuste.

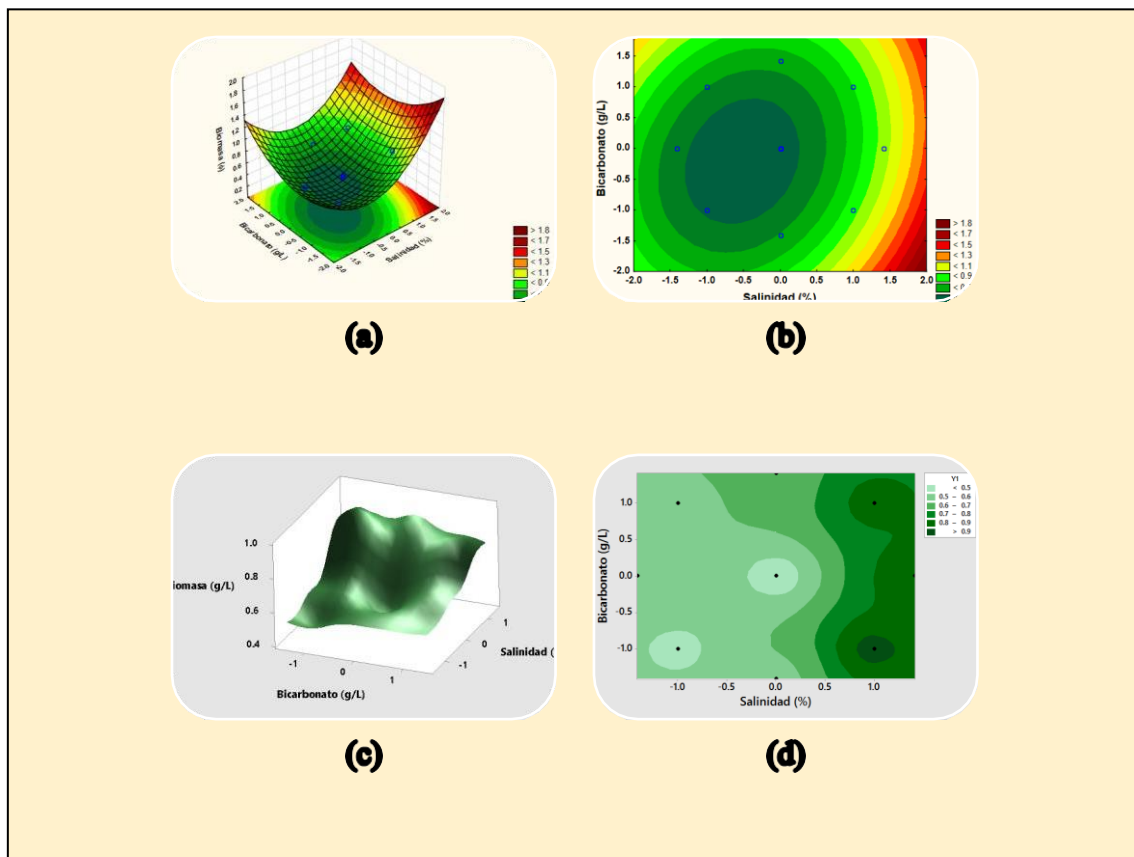


Figura 2. Superficies de respuestas y gráficos de contornos modelados en Statistica (a y b) y graficados en Minitab (c y d) de la biomasa, con factores codificados, en el estudio de Vásquez *et al.*

DISCUSIÓN DE RESULTADOS

La metodología de superficie de respuesta (MSR) es un conjunto de técnicas estadísticas para el modelo y análisis de problemas en los que una respuesta de interés es influenciada por diversas variables independientes con el objetivo de optimizar la respuesta (Montgomery, 2013). Las corridas experimentales comprenden puntos factoriales, puntos centrales y puntos axiales. Y, de acuerdo al propósito de la metodología es inconcebible que, en los experimentos evaluados empleando un diseño central rotatable de segundo orden, para cada variable respuesta no se haya precisado con claridad si se trata de maximizar o minimizar cada respuesta.

Los experimentos realizados por Gamboa *et al.* (2014), Miano *et al.* (2014) y Vásquez *et al.* (2014), teóricamente incluyeron en los factores puntos axiales $\alpha = \sqrt{2} = 1.41421$ para corridas cumplir con la rotabilidad del diseño experimental y constituir un diseño central rotatable de segundo orden. Sin embargo, se ha observado que, en el artículo publicado por Vásquez *et al.*, los valores originales de los factores no han sido determinados con el cuidado necesario que se requiere, de manera que los valores codificados de los mismos cumplan con la rotabilidad del diseño.

La rotabilidad significa que la variabilidad de la respuesta estimada es la misma para todos los puntos de los factores que están a la misma distancia del centro del diseño, proporcionando igual precisión en las estimaciones en todas direcciones, siendo importante para que se cumpla la rotabilidad

la determinación apropiada de los puntos axiales: $\alpha = 4/\sqrt{n_f}$, donde n_f es el número de puntos en la parte factorial (Montgomery, 2013). En realidad, la propiedad de rotabilidad del diseño forma parte de la literatura básica de diseño y análisis de experimentos, pero también de literatura especializada, como la de Box y Draper (2007) o la de Myer *et al.* (2016), este último texto está en su cuarta edición.

En el diseño o planeación de experimentos, el software Statistica empleado en los estudios evaluados, desde versiones anteriores, permite simular diseños experimentales centrales rotables de segundo orden, presentado los factores en valores codificados, pero que permiten obtener los valores experimentales de los factores tal como se debe utilizar en el experimento haciendo un proceso de recodificación. Los investigadores que diseñen experimentos factoriales o de superficie de respuesta deben estar entrenados en codificación y recodificación de variables.

El primero consiste en codificar los factores convirtiéndolos a los valores: ± 1 , 0, $\pm \alpha$. El segundo, por el contrario, convierte los valores codificados a valores originales de los factores. Manejar ambos procedimientos es indispensable para evitar errores en la selección de los niveles de los factores a experimentar, como ocurrió en el trabajo de Vásquez *et al.*

En la simulación de un diseño central rotatable de segundo orden es necesario haber elegido los valores mínimo y máximo de cada factor con los que se deberá experimentar. Statistica, a fin de no introducir un problema de autocorrelación de los errores permite asignar un orden aleatorio a las corridas experimentales en la opción DOE (diseño experimental óptimo). Los softwares Minitab, Statgraphics y Design-Expert, entre otros programas estadísticos contienen el menú DOE.

La rotabilidad no es la única propiedad que se desea en un diseño central rotatable de segundo orden, sino también la ortogonalidad. Un diseño es ortogonal cuando las columnas de la matriz del diseño son independientes entre sí (Gutiérrez, 2008). La ortogonalidad permite estimar de manera independiente los términos del modelo, facilitando la realización del análisis, porque se pueden eliminar términos que no son significativos sin cambiar los estimados para los términos que permanecen en el modelo (Montgomery, 2013).

El software Statistica cuando diseña las características del diseño permite elegir el valor α para cumplir con la rotabilidad o la ortogonalidad, incluso es posible agregar puntos centrales al diseño para elegir α de manera que cumpla con ambas propiedades. Montgomery (2013), formaliza fórmulas para determinar el número de corridas experimentales para cumplir con estas propiedades. Mayores detalles para simular diseños rotables de segundo orden con Minitab o Design-Expert pueden encontrarse en Montgomery (2013) y Myers *et al.* (2016), con Statgraphics y Minitab en Gutiérrez (2008), y con únicamente Minitab en Box y Draper (2007).

En los diseños ortogonales no debe presentarse multicolinealidad, la cual hace menos precisa la estimación de la superficie de respuesta. En los análisis de los experimentos de Gamboa *et al.*, Miano *et al.* y Vásquez *et al.* se evadió la evaluación de este supuesto al trabajar los factores con unidades originales, no codificados.

Como se sabe, la multicolinealidad es la relación entre las variables independientes (Gujarati y Porter, 2010), hay varias causas, diversas maneras de detectar el problema de multicolinealidad, varias medidas para resolverlo, pero también múltiples consecuencias si no se resuelve el problema. Un valor del factor inflador de la varianza (FIV) igual a 1 indica que no hay multicolinealidad, pero un FIV superior a 10 es indicador de alta multicolinealidad. Best y Wolf (2015), establecen que modelos polinomiales de alto orden a menudo presentan problemas de multicolinealidad. Los modelos para diseños centrales rotables de segundo orden constituyen modelos polinomiales.

En el presente estudio para detectar la multicolinealidad se empleó los FIV's y el hecho de que

hubiera un R^2 elevado pero pocas pruebas T significativas como elemento secundario (Gujarati y Porter, 2010; Weisberg, 2014). En los estudios evaluados, los FIV's con los factores originales fueron superiores a 10, indicando alta multicolinealidad. En este sentido, el análisis realizado evadió el supuesto de no multicolinealidad en todos los casos. En cambio, se mostró que, si el análisis de superficie de respuesta se hace con los factores codificados, los FIV's, son próximos a 1, eliminando el problema de multicolinealidad, y como consecuencia estimando los coeficientes de regresión con mayor precisión.

Una justificación a la que podrían acogerse es que el tema de multicolinealidad no es tratado expresamente en literatura de diseños de experimentos o diseños de superficie de respuesta, sino en literatura de análisis de regresión o de econometría antes mencionados. Como medio de verificación, se hizo una búsqueda de los artículos de la revista *Scientia Agropecuaria* con el término multicolinealidad, no encontrándose resultado alguno. Asimismo, la multicolinealidad no fue mencionada en los estudios de Reyes *et al.* (2005), Zapata *et al.* (2011), Zapata y Montoya (2011), Corona *et al.* (2013) y Del Ángel *et al.* (2015), y muy probablemente, sin percatarse del problema, se haya dejado a las posibilidades que presenta el software Statgraphics empleado en aquellos estudios.

En un diseño factorial de dos niveles, por lo general se anticipa que el ajuste del modelo es de primer orden, pero se deberá estar alerta a la posibilidad de que el modelo de segundo orden sea en realidad más apropiado (Montgomery, 2013). Los puntos centrales permiten estimar el efecto de la curvatura en un diseño central de segundo orden y evaluar su magnitud a través de la prueba de la falta de ajuste. Los experimentos en evaluación incorporaron tres puntos centrales en el trabajo de Gamboa *et al.* y cuatro puntos centrales en los de Miano *et al.* y Vásquez *et al.*

La prueba de la falta de ajuste no fue considerada en los experimentos evaluados. Y, no es cierto que sean aplicables únicamente en los diseños de superficie de respuesta, sino que es más común en los modelos de regresión. Para poder aplicar la prueba de falta de ajuste es necesario contar réplicas del experimento o al menos réplicas en los puntos centrales. A pesar de tener puntos centrales en los diseños, la evaluación de la no falta de ajuste fue considerada únicamente en los trabajos de Zapata *et al.* (2011), y Zapata y Montoya (2012), no encontrándose evidencia de no falta de ajuste. La prueba no fue realizada en los estudios de Reyes *et al.* (2005), Zapata *et al.* (2011), Corona *et al.* (2013) y Del Ángel *et al.* (2015).

Es cierto, que con el pasar del tiempo puede haber ciertas mejoras en el diseño como en el análisis de experimentos. Se puede incluir más factores en estudio o considerar la multirespuesta en un diseño factorial con replicación fraccional, verificando asimismo que se llegó al óptimo que corresponda a la respuesta a través de otro software estadístico como Statgraphics (Cedano *et al.*, 2015), pero el beneficio será limitado si en el análisis no se recurre al empleo de los factores en unidades codificadas y se aprovecha la presencia de réplicas en los puntos centrales para evaluar la no falta de ajuste. También se puede incluir algoritmos genéticos en el proceso de optimización de una variable respuesta para comparación con la metodología de superficie de respuesta (Vásquez *et al.*, 2016), pero la comparación de las técnicas no será apropiada si se persiste en mantener los protocolos de análisis convencionales en esta última.

Finalmente, se debe indicar que no es apropiado estimar las superficies de respuesta cuando el modelo de regresión involucrado no se ajusta a la superficie interpolada. Sin embargo, hay que resaltar que el tema de falta de ajuste que aparecen en los programas estadísticos para el proceso de optimización en el análisis de diseños experimentales, desde hace mucho tiempo aparece en la ciencia estadística desde la década del 80 del siglo anterior. La evaluación de la no falta de ajuste está directamente relacionada al número de términos a retener en un modelo de regresión, o en un diseño central compuesto de segundo orden.

CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

En los tres artículos evaluados de la Revista Ciencia Agropecuaria se diseñaron experimentos centrales rotatables de segundo orden y analizaron empleando metodología de superficie de respuesta, con los factores en valores originales, esto condujo a la presencia de alta multicolinealidad en la estimación de parámetros. La evaluación comprendió un total de siete modelos de superficie de respuesta, no precisándose claramente en los artículos la necesidad de maximizar o minimizar la respuesta, y llegando a conclusiones a partir de modelos estimados que mostraban una evidente falta de ajuste.

El mecanismo para mejorar el diseño y análisis de los experimentos es hacer una revisión de la literatura para seleccionar los factores y sus niveles a incluir en el experimento, simular aleatoriamente el diseño empleando un programa estadístico para optimizar la respuesta o la multirespuesta en caso de haber más de una variable dependiente, corroborando que los niveles correspondan al proceso de recodificación. La función objetivo de la respuesta, maximizar o minimizar, debe conocerse desde el inicio. Antes de ejecutarse el experimento, llevar a cabo un proceso de calibración intra e inter-evaluador a fin de asegurarse que las mediciones estén bien hechas. En el análisis de datos utilizar un programa estadístico que permita determinar la solución óptima con los factores codificados, y que además evaluar la no falta de ajuste y los demás supuestos exigidos para modelos de regresión múltiple. Asimismo, eliminar del modelo los factores que no alcanzaron la significancia estadística, volviendo a evaluar el modelo reducido.

Finalmente, se recomienda la incorporación de al menos un estadístico en el panel de revisores de la revista Scientia Agropecuaria.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Best, H; Wolf, Ch. 2015. The SAGE of Regression Analysis and Causal Inference. SAGE Publications Ltd, Los Angeles.
- Box, G; Daper, N. 2007. Response Surfaces, Mixtures, and Ridge Analyses. Second edition. John Wiley & Sons, U.S.A.
- Cedano, J; Rodríguez, A; Siche, R. 2015. Maximizing content of Omega-3 (EPA and DHA) in the process of enzymatic acidolysis of canola oil and concentrated of long-chain polyunsaturated fatty acids (LCPUFA) in supercritical CO₂ conditions. Scientia Agropecuaria 6(4): 313-323.
- Corona, R. I.; Ramos, J.R.; Gutiérrez, P.; Pelayo, C.; Guatemala, G. M.; Arriola, E. 2013. The use of response surface methodology to evaluate the fermentation conditions in the production of tepache. Revista Mexicana de Ingeniería Química 12(1): 19-28
- Del Ángel, M.T.; García, P; Lagunes, L.M.; García, R.; Cabrera, E.G. 2015. Aplicación de metodología de superficie de respuesta para la degradación de Naranja de metilo con TiO₂ sol-gel sulfatado. Revista internacional de contaminación ambiental 31(1): 99-106.
- Gamboa, D; Ibáñez, D; Meléndez, M; Paredes, E.; Siche, R. 2014. Secado de lúcumo (*Pouteria obovata*) empleando la técnica de Ventana RefractanteTM. Scientia Agropecuaria 5: 103 – 108.
- Gujarati, D; Porter, D. 2010. Econometría. Quinta edición. McGraw Hill. México.
- Gutiérrez, H; De la Vara, R. (2008). Análisis y diseño de experimentos. Segunda edición. McGraw Hill. México.
- Miano, A; Rojas, C.; Barraza, G. 2014. Influencia de la temperatura y tiempo de extracción en la fuerza de gel y rendimiento de gelatina obtenida a partir de piel de tollo (*Mustelus mento*). Scientia Agropecuaria 5: 140 – 147.
- Montgomery, D. 2013. Design of analysis of experiments. Eighth edition. John Wiley & Sons, U.S.A.

- Myers, R.H.; Montgomery, D. C.; Anderson, CH. M. 2016. Response Surface Methodology: Process and product optimization using designed experiments. Fourth edition. Wiley, U.S.A. Reyes. G; Corzo, O.; Bracho. N. 2005. Optimización de la deshidratación osmótica de sardina mediante la metodología de superficies de respuesta. Revista Científica, FCV- LUZ, 15(4): 377- 384.
- Vásquez, V.; Vergaray, D.; Suárez, S.; Valladares, J.; Zamora, A.; Gaspar, K.; Ecurra, X. 2014. Influencia de la proporción agua de mar y bicarbonato en la producción de biomasa de *Spirulina* sp. con iluminación de diodo emisor de luz. Scientia Agropecuaria 5: 199 – 209.
- Vásquez, V.; Rojas, C.; Rojas, J.; Hernández, O.; Vásquez, J.; Barreto, O. 2016. Optimización de la extracción de glucosinolatos de maca (*Lepidium meyenii*) por superficie de respuesta y algoritmos genéticos. Scientia Agropecuaria 7(3): 275 – 284.
- Weisberg, S. 2013. Applied Linear Regression. Fourth edition. Wiley, U.S.A.
- Zapata, J.E.; Arias, J.M.; Ciro, G.L. 2011. Optimization of osmotic dehydration of pineapple (*Ananas comosus* L.) using the response surface methodology. Agronomía Colombiana 29(2): 249-256.
- Zapata, J.E.; Montoya, A. 2012. Deshidratación Osmótica de Láminas de Mango cv. Tommy Atkins Aplicando Metodología de Superficies de Respuesta. Revista Facultad Nacional de Agronomía - Medellín 65(1): 6507-6518.